

Untersuchung des Mischens von hochviskosen Flüssigkeiten mittels Partikeltracking

Mischen in Rührkesseln ist eine der grundlegendsten und wichtigsten Anforderungen für die meisten Produktionssysteme in der Industrie. In der Vergangenheit wurden umfangreiche experimentelle Untersuchungen von vielen Forschern durchgeführt, um die Effekte unterschiedlicher Parameter auf die Mischeffizienz von verschiedenen Apparaturen mit unterschiedlichen Prozessbedingungen und Materialeigenschaften zu untersuchen. Jedoch kann die Wiederholung dieser Experimente für kleine Änderungen des Designs oder bei der Untersuchung unterschiedlicher zu mischender Flüssigkeiten schnell teuer und mühsam werden. Parallel zu diesen experimentellen Untersuchungen sind auf Computer basierten Simulationsmethoden (*Computational Fluid Dynamics, CFD*) seit 20 Jahren ein weithin verwendetes Werkzeug geworden, um das Design von Mischprozessen zu analysieren, zu optimieren und zu unterstützen. Numerische Spurstoffexperimente, Lagrange Partikeltracking und auf Entropie basierende Berechnungen sind dabei die am meisten verwendeten Methoden.

Allerdings werden numerische Spurstoffexperimente stark erschwert, wenn Vorhersage über das Fließverhalten von hochviskosen Flüssigkeiten in Mischern getroffen werden müssen. In diesem Fall wird eine ausreichend genaue Lösung der Speziesgleichung wegen numerischer Diffusion (künstlich generierte Glättung von Spurstoffprofilen aufgrund der Diskretisierungsfehler) nicht erreicht. Diese numerische Diffusion kann manchmal sogar stärker sein als die eigentliche physikalische Diffusion. Das Ersetzen der kontinuierlichen Spurstoffkonzentration durch eine Anzahlkonzentration aus den während der Simulation verfolgten Lagrange-Partikeln vermeidet dieses Problem. Diese Vorgehensweise wird nicht durch numerische Diffusion beeinflusst, da der Aufenthaltsort der Spurstoffpartikel mit Subgitterskala- Genauigkeit aufgelöst wird. Das Strömungsfeld an diesen Partikelpositionen kann durch Interpolation seiner Werte an den Gitterpunkten erhalten werden

In der vorliegenden Arbeit wurde die Methode für die Berechnung der Segregationsintensität, der Mischintensität und der Mischzeit auf Basis von Lagrange Particle Tracking Methoden diskutiert. Der gesamte Berechnungsbereich wird dabei in Subvolumina und Partikel geteilt. Am Anfang werden Partikel in einem Subvolumen platziert. Im Laufe des Particle Tracking Prozesses wird die resultierende räumliche Verteilung der Anzahlkonzentration gespeichert, was eine Berechnung der zeitlichen Änderung ihrer Varianz erlaubt. Eine grundlegende Frage bei dieser Vorgehensweise ist die notwendige Anzahl an Subvolumina und Partikeln für eine zuverlässige Bewertung der Mischqualität. Basierend auf statistischen Überlegungen kann gezeigt werden, dass eine zuverlässige Mischzeit $t_M^{1-\varepsilon}$ für ein gegebenes Niveau $\varepsilon > 0$ immerhin $100/\varepsilon^2$ Partikel erfordert (wenn die Standardabweichung anstelle der Varianz eingesetzt wird), während eine überraschende niedrige Anzahl an Subvolumina von 20 ausreichend ist.

Diese Methode wurde durch die numerische Untersuchung des Mischens in einem Kessel bewertet, welcher mit einem Ankerrührer und speziellen Knetelementen gerührt wurde. Das Mischen in dieser Art von Rührkesseln wird durch die relative Bewegung zwischen fixierten Wänden (Stator) und rotierenden Laufrädern (Rotor) verursacht. Eine *single rotating reference frame method* wird verwendet, um die Strömung in dieser Art von Apparaturen zu modellieren. Dabei wird die Navier-Stokes Impulsgleichung unter Berücksichtigung der Coriolis- und Zentrifugalkräfte geändert und für laminare Strömungsbedingungen gelöst. Die Untersuchung wird mit Hilfe des kommerziellen CFD-Software Pakets Star-CD (Finite Volumen) durchgeführt. Anschließend wird eine Mapping-Matrix-Methode etabliert, um die Qualität des Mischens zu

bewerten. Diese Mapping-Methode verwendet eine Transition-Matrix, welche die Anzahl an Partikeln beschreibt, die von einem Subvolumen zu einem anderen Subvolumen in einem speziellen Zeitintervall transportiert werden. Mit Hilfe dieser Transition-Matrix können zeitliche Änderungen der Varianz und Mischzeiten mittels Vektormultiplikation mit einem erheblich geringeren Aufwand berechnet werden.